

## KOKKUVÕTE

Rene Väli magistritöö eesmärgiks on skandium-dopeeritud  $ZrO_2$  lokaalse struktuuri ja faaside analüüs ja hinnanguline võrdlemine tahke keha tuumamagnetresonants spektroskoopia ja röntgendifraktsiooni meetoditel kogutud andmete põhjal.

Dopeeritud  $ZrO_2$  on lootustandev elektrolüütmaterjal, mille uurimine on kestnud juba aastakümneid, kuid mille käitumisest puudub siiani terviklik arusaamine. Põhjusteks on muuhulgas struktuuri segafaasilisus ning faaside stabiilsuse ja faasiülemineku tingimuste sõltumine nii kristalliitide suurusest, kui ka dopandi kontsentratsioonist.

Suure tundlikkuse tõttu on TMR informatiivne meetod materjali lokaalse struktuuri uurimiseks. Sel põhjusel teostati pulbriproovide põhjalikud MAS TMR mõõtmised, mille analüüs moodustas suure osa käesoleva töö mahust. Mõõteproovide XRD analüüs moodustas teise mahuka osa magistritööst. XRD ja TMR mõõtetulemuste osalise mittevastavuse tõttu viidi läbi täiendavad Raman spektroskoopia mõõtmised.

Püstitatud eesmärgid said täidetud: oli võimalik kindlaks määrata  $^{45}Sc$  MAS TMR spektrihoonte ja XRD analüüsist määratud faaside vaheline vastavus. Spektrihoonte analüüsi põhjal tehti kindlaks korrelatsioon monokliinse ja tetragonaalse faasiga.

Segafaasiliste materjalide korral ei olnud XRD ja TMR andmete vastavus täielik, mille põhjendamine nõuab edasisi uuringuid. TMR spektrite analüüsi käigus omandatud info abil püstitati veel täiendavaid hüpoteese dopant-naabrite ja vakantside paiknemisest, mis vajavad edasist katselist kinnitamist või ümberlükkamist.